Index

Commentationes et Relationes

Baerends, E.J., Ellis, D.E., Ros, P.: A Theoretical Study of the Interaction of Ethylene with Transition Metal Complexes . . . 339

Barthelat, J.C., Durand, Ph.: Orbitales moléculaires localisées: structure électronique de la molécule de méthane . . . 109

Bendazzoli, G.L., Bernardi, F., Geremia, A., Palmieri, P.: A.M.O. Calculations for Some First Row Diatomic Molecules . . . 63

Bernardi, F., S. Bendazzoli, G.L., *et al.* . . . 63

Buenker R.J., s. Peyerimhoff, S.D. . . . 243

Burden, F.R., Wilson, R.M.: Least-Squares Gaussian Expansions of Atomic Orbitals . . 151

Čársky, P., s. Zahradník, R. . . . 121

Chang, S., s. Loew, G.H. . . . 273

Colpa, J.P., Islip, M.F.J.: Analysis of Correlation Effects in HeI, LiI and BeI Iso-electronic Sequences by Z-expansion Methods . . . 25

Cook, D.B.: A Note on General Core-Valence Orthogonality . . . 161

Copeland, D.A.: Approximate Radial Functions
I. First-Row Transition-Metal 4s and 3d Atomic Orbitals . . . 367

Coutière, M.-M., Demuynck, J., Veillard, A.: Ionization Potentials of Ferrocene and Koopmans' Theorem. An *ab-initio* LCAO-MO-SCF Calculation . . . 281

Demuynck, J., s. Coutière, M.-M., *et al.*. . . . 281

Dewar, M.J.S., Weiner, P.: Ground States of Molecules
XXIII. MINDO/2 Calculations for Naphthalene . . . 373

Diercksen, G.H.F., s. Kraemer, W.P. . . . 265

Durand, Ph., s. Barthelat, J.C. . . . 109

Edwards, T.G.: Assignments in Photoelectron Spectroscopy Using the CNDO/2 Method 1

Ellis, D.E., s. Baerends, E.J., *et al.* . . . 339

Ellison, F.O., Larcom, L.L.: Atoms-in-Molecules Treatment of Li_2^+ and Li_2 Using Optimum Gaussian Approximations of Li^+ and Li Eigenstates . . . 81

Fischer-Hjalmars, I., Kowalewski, J.: Simplified Non-Empirical Excited State Calculations
Part I. The Rydberg ns and $np\sigma$ Series of Ethylene . . . 197

Gelius, U., Roos, B., Siegbahn, P.: MO-SCF-LCAO Studies of Sulphur Compounds . . . 171

Geremia, A., s. Bendazzoli, G.L., *et al.*. . . . 63

Gliemann, G., Plath, P.: Spin-Bahn-Wechselwirkung räumlich beschränkter Elektronensysteme . . . 153

Goldstein, J.H., s. Long, K.R. . . . 75

Guidotti, C., Lamanna, U., Maestro, M., Moccia, R.: Barriers to the Internal Rotation and Observables of the Ground State for Hydrogen Peroxyde . . . 55

Hartmann, H.: Über die Hartreesche Methode . . . 147

Henriksson, A., Sundbom, M.: Semiempirical Molecular Orbital Studies of Phthalocyanines
I. The Electronic Structure and Excited States of Phthalocyanine, H_2Pc . . . 213

Henriksson, A., Roos, B., Sundbom, M.: Semiempirical Molecular Orbital Studies of Phthalocyanines
II. The Electronic Structure and Excited States of Copper Phthalocyanine, CuPc . 303

Higuchi, J.: Effect of Atomic Dipole in Semi-Empirical Calculation of π-Electron Energy Levels . . . 315

Islip, M. F. J., s. Colpa, J. P. 25

Jansen, H. B., Ros, P.: On the Use of Small Atomic Basis Sets in Non-Empirical Molecular Calculations 95

Jaszuński, M., Sadlej, A. J.: Proton Magnetic Shielding in the Water Molecule 135

Jungen, M.: Spin-Bahn-Kopplungseffekte verschiedener Ordnung bei Jod und Dijodazetylen 33

Kahn, O., Kettle, S. F. A.: Influence du couplage vibronique sur le paramagnétisme d'un complexe cubique dans l'état électronique $^2T_2$ 187

Kettle, S. F. A., s. Kahn, O. 187

Kowalewski, J., s. Fischer-Hjalmars, J. 197

Kraemer, W. P., Diercksen, G. H. F.: SCF LCAO MO Studies on the Hydration of Ions: The System $F^- \cdot 2H_2O$ 265

Lamanna, U., s. Guidotti, C., *et al.* 55

Langlet, J.: PCILO Method for Excited States
I. Construction of the Zeroth Order Wave- Function for Planar Conjugated Systems . 223

Larcom, L. L., s. Ellison, F. O. 81

Loew, G. H., Chang, S.: Energy-Conformation Studies of Hydrogen Cyanide Tetramer: A Prebiotic Precursor 273

Long, K. R., Goldstein, J. H.: EHT Conformational Study of Nicotinamide and Related Amides 75

Maestro, M., s. Guidotti, C., *et al.* 55

Moccia, R., s. Guidotti, C., *et al.* 55

Morita, H., Nagakura, S.: CNDO/2 Calculations and Configuration Analyses for Some Hydrogen-Bonded Systems 325

Nagakura, S., s. Morita, H. 325

Niessen, W. v.: Density Localization of Atomic and Molecular Orbitals II. Homonuclear Diatomic Molecules 9

Palmieri, P., s. Bendazzoli, G. L., *et al.* 63

Pamuk, H. Ö., s. Sinanoğlu, O. 289

Peyerimhoff, S. D., Buenker, R. J.: Vibrational Analysis of the Electronic Spectrum of Ethylene Based on *ab initio* SCF-CI Calculations 243

Plath, P., s. Gliemann, G. 153

Roche, M., Simon, J.-C.: De la possibilité d'utiliser une base de Slater uniquement *s* dans les calculs relatifs aux atomes et aux molécules 165

Rosenfeld, Yu. R., s. Vekhter, B. G., *et al.* 49

Roos, B, s. Gelius, U., *et al.* 171

Roos, B., s. Henriksson, A., *et al.* 303

Ros, P., s. Baerends, E. J., *et al.* 339

Ros, P., s. Jansen, H. B. 95

Sabin, J. R.: A Model Study of the Interaction of a Hydrogen Bond with a π-Electron System 69

Sadlej, A. J., s. Jaszuński, M. 135

Siegbahn, P., s. Gelius, U., *et al.* 171

Simon, J.-C., s. Roche, M. 165

Sinanoğlu, O., Pamuk, H. Ö.: A Semi-Empirical MO-Electron Correlation Method for Molecules and the Correlation Energies of π-System Linear and Polycyclic Hydrocarbons 289

Stewart, R.F., s. Webster, B.C. 355
Sundbom, M., s. Henriksson, A., *et al.* 213, 303
Tsukerblat, B.S., s. Vekhter, B.G., *et al.* 49
Veillard, A., s. Coutière, M.-M., *et al.* 281
Vekhter, B.G., Tsukerblat, B.S., Rosenfeld, Yu.R.: Optical Manifestation of Jahn-Teller Effect in Square-Planar Complexes 49
Webster, B.C., Stewart, R.F.: First Order Pair Functions for the Beryllium Isoelectronic Sequence 355
Weiner, P., s. Dewar, M.J.S., ... 373
Wilson, R.M., s. Burden, F.R. 151
Zahradník, R., Čársky, P.: Open Shell CNDO Treatments on Small Alipathic Radicals. Electronic Spectra and Some Ground State Properties 121

Indexed in Current Contents

Instructions to Authors

1. *Manuscripts* should be submitted in duplicate, typed in double-line spacing on one side of the paper only. Form and contents should be carefully checked to exclude the need for corrections in proof. To speed up publication, authors will receive only one set of proofs: provisionally numbered page proofs. Authors are requested to correct typographical errors only; they will be charged for corrections involving changes, additions, or deletions to the original manuscript.

Formulae should be typewritten whenever possible, special attention being given to the placing of indices and exponents so that they are recognizable as such even though there is no difference in size. Formulae should preferably be written in a "linear" form (e.g. $\exp(-\varepsilon/kT)$ instead of $e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$). Special typefaces (Greek, Script) should be shown by underlining in color. To avoid confusing the printer, please use red for Greek and green for Script, and underline in brown for bold face. Characters which are easily confused, e.g. 0 (zero) and capital O (letter) or 1 (figure one) and small *l* (letter), should have some special distinguishing mark. When formulae are inserted by hand, small letters should be underlined once and capital letters twice.

2. *Illustration copies* (graphs and structural formulae) should be drawn in Indian ink in clean uniform lines and sent in on separate sheets. Please mark in the margin of the manuscript where diagrams and tables should be inserted. Captions, which should be brief, should be typed separately and attached to the manuscript.

3. Original papers should be preceded by a *summary* (not more than 100 words) in English, German and French. (The editorial staff is willing to translate English summaries if asked.) Short notes need only an English summary. Papers not written in English should have an *English title* for use by such journals as Current Contents.

4. *Literature references* should be numbered and listed at the end of the paper. They should be cited as follows: *journal papers* — names and initials of all authors, journal in the accepted abbreviation, volume and page number, year; *books* — names of authors, full title, edition, place, publisher and year. References should be cited in the text by number.

5. 75 *offprints* of each paper will be supplied free of charge; additional copies may be ordered at cost price.

6. *Editorial enquiries* should be addressed to:
Prof. Dr. HERMANN HARTMANN, Theoretica Chimica Acta, Institut für physikalische Chemie der Universität, Robert-Mayer-Straße 11, D-6000 Frankfurt am Main 1

Manuscripts should be sent to the Editor or to one of the Co-editors:

Prof. Dr. CARL J. BALLHAUSEN, Chemical Laboratory IV, H. C. Ørstedinstitutet, Universitetsparken 5, København Ø, Danmark,

Prof. Dr. RONALD D. BROWN, Monash University, Department of Chemistry, P. O. Box 92, Clayton, Victoria, Australia 3168,

Prof. Dr. EDGAR HEILBRONNER, Physikalisch-Chemisches Institut der Universität Basel, CH-4000 Basel, Klingelbergstraße 80, Switzerland,

Prof. Dr. J. JORTNER, Department of Chemistry, Tel-Aviv University, Tel-Aviv, Israel,

Prof. Dr. MASAO KOTANI, 36-4 Sanno 3 chome, Ota-ku, Tokyo 143, Japan,

Prof. Dr. JAROSLAV KOUTECKÝ, Československá Akademie Věd. Ústav Fyzikální Chemie, Praha 2-Vinohrady, Máchova 7, ČSSR,

Prof. Dr. JACK W. LINNETT, Department of Physical Chemistry, Lensfield Road, Cambridge, England,

Prof. Dr. E. E. NIKITIN, Institute of Chemical Physics, Academy of Sciences, Vorobyevskoye Chaussée 2b, Moskwa V-334, USSR,

Prof. Dr. RALPH G. PEARSON, Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, Illinois 60201, USA,

Prof. Dr. BERNARD PULLMAN, Université de Paris, Institut de Biologie physico-chimique, 13, rue Pierre Curie, Paris V, France,

Prof. Dr. KLAUS RUEDENBERG, Department of Chemistry, Iowa State University of Science and Technology, Ames, Iowa 50010, USA,

Prof. Dr. CAMILLE SANDORFY, Université de Montréal, Case Postale 6128, Montréal, Canada,

Prof. Dr. MASSIMO SIMONETTA, Istituto di Chimica Fisica dell'Università di Milano, Via Saldini, 50, Milano, Italia,

Prof. Dr. OKTAY SINANOĞLU, Department of Chemistry, Yale University, 225 Prospect Street, New Haven, Conn. 06520, USA.

Hinweise für die Autoren

1. *Manuskripte* werden mit einer Kopie, auf einseitig beschriebenen Blättern mit doppeltem Zeilenabstand erbeten. Die Manuskripte müssen formal wie inhaltlich so durchgearbeitet sein, daß Änderungen in den Korrekturfahnen unnötig sind. Zur Abkürzung der Publikationszeit erhalten die Autoren nur *eine* Seitenkorrektur mit provisorischen (*kursiven*) Seitenzahlen. Es sollen darin nur Satzfehler berichtigt werden. Nachträgliche (vom Manuskript abweichende) Korrekturen müssen den Autoren berechnet werden.

Alle Formeln sind möglichst mit der Maschine zu schreiben. Dabei ist darauf zu achten, daß Indices und Exponenten trotz des fehlenden Größenunterschiedes genau als solche zu erkennen sind. Besondere Lettern (griechische, Script) sind durch farbige Unterstreichungen zu kennzeichnen. Zur Vereinfachung für den Setzer wird gebeten, griechische Buchstaben rot, Scripttypen grün und halbfette braun zu unterstreichen. Auch einander ähnliche Zeichen, z. B. 0 (Null) und O (Buchstabe) oder 1 (Eins) und *l* (Buchstabe) sind besonders zu kennzeichnen. Bei handgeschriebenen Formeln ist bei allen vorkommenden Alphabeten zwischen Groß- und Kleinbuchstaben (durch doppeltes bzw. einfaches Unterstreichen) zu unterscheiden.

2. *Abbildungsvorlagen* werden als Tuschezeichnungen mit tiefschwarzem einheitlichen Strich auf besonderen Blättern erbeten. Am Manuskriptrand ist deutlich ihre Plazierung und die von Tabellen zu vermerken. Kurze Abbildungsunterschriften sollen am Schluß des Manuskripts beigefügt werden.

3. Bei Originalarbeiten wird um je eine *Zusammenfassung* (nicht über 100 Wörter) in Englisch, Deutsch und Französisch, bei Kurzmitteilungen um eine in Englisch gebeten. (Übersetzung ins Französische kann in der Redaktion vorgenommen werden.) Nichtenglischen Arbeiten soll außerdem eine englische Titelübersetzung beigefügt werden.

4. *Literaturangaben* sind am Schluß der Arbeit zusammenzustellen und zu numerieren. Sie enthalten Namen und nachgestellte Initialen aller Autoren, den nach den internationalen Regeln gekürzten Zeitschriftentitel, Band-, Seiten- und Jahreszahl; bei *Büchern* Autorennamen, vollen Titel, Auflage, Ort, Verlag und Jahr. Zitierung im Text erfolgt mit Nummer.

5. Von jeder Arbeit werden 75 *Sonderdrucke* kostenlos zur Verfügung gestellt. Weitere Separata können von den Autoren zum Selbstkostenpreis bezogen werden.

6. *Redaktionelle Anfragen* sind zu richten an:
Theoretica Chimica Acta, Prof. Dr. HERMANN HARTMANN.
Manuskripte können an alle Mitherausgeber eingesandt werden. Adressen umstehend.

Indications pour les auteurs

1. Les *manuscripts* seront envoyés en deux exemplaires dactylographiés au recto seulement. Tant la forme extérieure que le contenu doivent avoir leur aspect définitif, afin que des corrections sur les épreuves ne soient plus nécessaires. Afin d'accélérer la publication, les auteurs ne recevront qu'une seule épreuve dont les pages seront numérotées provisoirement. Seul les fautes de typographie devront être corrigées; toute autre correction entraînant des modifications, additions ou suppressions au texte original sera facturée aux auteurs. Dans la mesure du possible les formules doivent être tapées à la machine. On veillera à ce que les indices et les exposants soint facilement reconnaissables lorsqu'ils ne sont pas différenciés par leur taille. Sinon, ils devront être inscrits à la main. Les lettres spéciales (grecques, script) doivent être soulignées en couleur. Pour simplifier le travail du typographe on recommande de souligner en rouge les lettres grecques et en vert les script. Les lettres grasses seront soulignées en brun. Dans la mesure où des caractères manuscrits sont utilisés on distinguera (même pour les caractères latins) les majuscules, qu'on soulignera deux fois, des minuscules, soulignées une fois. Des difficultés spéciales naissent du fait que les machines à écrire ne font pas, en général, de différence entre 0 (zéro) et O (lettre) ainsi qu'entre 1 (un) et *l* (lettre). Dans ce cas, des signes distinctifs sont absolument indispensables.

2. Des *graphiques* et des formules développées doivent être tracés en lignes noires à l'encre de Chine. Veuillez indiquer dans la marge du manuscrit où les graphiques et les tableaux doivent être disposés.

3. Les travaux originaux doivent comporter de brefs *résumés* (100 mots maximum), rédigés dans les 3 langues: anglais, français et allemand. Le résumé des communications brèves doit être rédigé en anglais. (Sur demande, le résumé original peut être traduit par la rédaction, en allemand). Pour faciliter la documentation un titre anglais doit être ajouté à chaque article n'étant pas écrit en anglais.

4. Les *références* bibliographiques seront numérotées et rassemblées à la fin du texte. Les citations se présenteront comme suit: noms et initiales de tous les auteurs, titre du journal abrégé selon les règles internationales, tome, numéros des pages et année. Les *livres* seront cités précédés du nom de l'auteur, titre complet, édition, lieu de publication, éditeur et date de parution. Les références dans le texte doivent être indiquées par des numéros.

5. 75 *tirés à part* de chaque article seront remis gratuitement aux auteurs. Pour les exemplaires supplémentaires le prix de revient sera facturé aux auteurs.

6. *Les demandes au rédacteur* doivent être adressées à
Theoretica Chimica Acta, Prof. Dr. HERMANN HARTMANN.
Les *manuscrits* peuvent être envoyés à tous les co-éditeurs (adresses susmentionnées).

Theoretica Chimica Acta

It is a fundamental condition that manuscripts submitted have not been, and will not be published elsewhere, either simultaneously or at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries. Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microform or any other reproductions of a similar nature may be made of the journal, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The use of registered names, trademarks, etc. in this publication does not imply, even in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protective laws and regulations and therefore free for general use.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, seinen Beitrag auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung, auch in Mikroform, an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,40 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

En principe, ne sont acceptés que des articles n'ayant jamais été publiés, ni dans leur pays d'origine, ni à l'étranger. L'auteur s'engage à ne pas remettre son manuscrit ailleurs après acceptation. Dès l'acceptation d'un manuscrit et sa publication par la maison d'édition, le droit d'impression pour toutes langues et tous pays, y compris le droit de reproduction photographique, en microforme ou par tout autre moyen, est acquis par la maison d'édition.

L'utilisation de marques déposées, marques de commerce, etc., dans ce journal, même sans indications particulière, n'implique pas que l'emploi de ces dénominations est exonéré des restrictions qu'imposent les lois régissant l'utilisation des marques déposées, etc.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 27 Fasc. 4

Commentationes

Loew, G.H., Chang, S.: Energy-Conformation Studies of Hydrogen Cyanide Tetramer: A Prebiotic Precursor 273

Coutière, M.-M., Demuynck, J., Veillard, A.: Ionization Potentials of Ferrocene and Koopmans' Theorem. An *ab-initio* LCAO-MO-SCF Calculation 281

Sinanoğlu, O., Pamuk, H.Ö.: A Semi-Empirical MO-Electron Correlation Method for Molecules and the Correlation Energies of π-System Linear and Polycyclic Hydrocarbons 289

Henriksson, A., Roos, B., Sundbom, M.: Semiempirical Molecular Orbital Studies of Phthalocyanines
II. The Electronic Structure and Excited States of Copper Phthalocyanine, CuPc . 303

Higuchi, J.: Effect of Atomic Dipole in Semi-Empirical Calculation of π-Electron Energy Levels 315

Morita, H., Nagakura, S.: CNDO/2 Calculations and Configuration Analyses for Some Hydrogen-Bonded Systems 325

Baerends, E.J., Ellis, D.E., Ros, P.: A Theoretical Study of the Interaction of Ethylene with Transition Metal Complexes 339

Webster, B.C., Stewart, R.F.: First Order Pair Functions for the Beryllium Isoelectronic Sequence 355

Relationes

Copeland, D.A.: Approximate Radial Functions
I. First-Row Transition-Metal 4s and 3d Atomic Orbitals 367

Dewar, M.J.S., Weiner, P.: Ground States of Molecules
XXIII. MINDO/2 Calculations for Naphthalene 373

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237
Telephone (0311) 8 83 01 31, Telex: 01-85 411

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1972